

Bírálat Jóvári Pál „Amorf ötvözetek atomi szintű szerkezetvizsgálata” című MTA doktori értekezéséről

A doktori értekezés különböző összetételű többkomponensű üvegek szerkezetének kísérleti vizsgálatával foglalkozik. Az amorf anyagok szerkezetvizsgálata hosszú távú rend hiányában a rövid távú rend jellemzését jelenti, konkrétan parciális párkorrelációs függvények, atomi koordinációs számok, kötéshosszak meghatározását. A vizsgálatok kísérleti módszerei a röntgen- és neutrodiffrakció (XRD, ND), valamint a különböző atomok röntgenabszorpciós élei távoli finomszerkezetének vizsgálata (EXAFS), a szerkezeti paraméterek mérési adatokból történő meghatározása pedig az ún. fordított Monte Carlo szimulációs módszer szolgál. A nagyberendezéseken (szinkrotronokon, illetve kutatóreaktorok vagy spallációs neutronforrások) alapuló kísérleti technika és az EXAFS mérések elméleti értelmezése körülbelül az ezredfordulóra érte el azt a fejlettséget, amely így, többféle független mérés és extenzív szimulációs számítások eredményeképpen már megbízhatóan képes többkomponensű üvegek szerkezetét jellemezni és a kísérletekkel összhangban lévő modellek alapján a vizsgált anyagok kémiai rendjét leírni. A Jelölt részese volt annak a folyamatnak, amely a kutatási irány kiteljesedését hozta az elmúlt tizenöt - húsz évben. Doktori dolgozata az ebbe a körbe tartozó eredményeket, különféle amorf tellúr-ötvözetek, valamint néhány amorf Cu-Zr alapú ötvözet szerkezetvizsgálatával kapcsolatos eredményeit tartalmazza.

Az értekezés igényes, szép kivitelű, nyelvtani, helyesírási hibát csak elvétve tartalmaz. Az ábrák és táblázatok túlnyomórészt jól áttekinthetőek, világosak. (Kivétel a 39. ábra, az általam olvasott példányban ez fekete-fehér, pedig a szöveg szerint a görbék felének pirosnak kellene lennie. Így nem is látható világosan a különbség.) A mű szerkezete is világos és áttekinthető, de annyiban szokatlan, hogy egy 4 oldalas bevezetés után a saját eredményeit tárgyaló fejezeteket megelőző, a vizsgálati módszer elveit ismertető „Alapok” című fejezet mindössze 16 oldalas. Ebben kapott helyet az amorf anyagok szerkezetének jellemzésére szolgáló mennyiségek értelmezése, az alkalmazott mérési és szimulációs módszerek elvei, a meghatározható szerkezeti információk fajtái és a bizonytalanságukat befolyásoló tényezők elemzése. Ezt a fejezetet egészíti ki a mű végén található 17 oldalas Függelék, ebben ír a Jelölt az alkalmazott kísérleti berendezésekről, további konkrét kísérleti részletekről, a mérési adatok korrekciójáról. A saját eredményeket tartalmazó két fejezet összesen 84 oldal terjedelmű,

ezekben találjuk viszont az egyes anyagcsaládokra vonatkozó irodalmi eredmények tárgyalását is az adott anyagcsaládokkal foglalkozó alfejezetek elején. A saját eredményekről szóló fejezetek után következik egy „Összefoglalás” fejezet, amely egyben a tézispontokat is tartalmazza. Az anyagcsaládonként hat csoportba rendezett, összesen 18 altézispont minden esetben atomi koordinációkkal kapcsolatos állításokat tartalmaz a disszertáció bevezető részében ismertetett elveknek megfelelően. Ezek az állítások minden esetben a disszertációban értelemszerűen nem bemutatható, több tízezer atomos modellrendszerek szimulált atomi pozícióiból számolt átlagos adatok, úgymint parciális párkorrelációs függvények és táblázatosan megadott koordinációs számok, esetenként átlagos kötésszögek alapján lettek megfogalmazva. Az egyes tézispontokat alátámasztó saját közleményeket a Jelölt a megfelelő tézispontok után, anyagcsaládonként csoportosítva adja meg. A tézispontokat elfogadom új tudományos eredményként.

Megjegyzések, kérdések

1. A disszertáció amorf anyagok vizsgálatáról szól, a Jelölt ezeket sok helyen üvegeknek is nevezi. Emellett előfordul a „nemkristályos szilárd anyag”, valamint a „túlhűtött folyadék” fogalom is. Ezek a fogalmak itt egymás szinonimájának tekinthetők vagy van köztük különbség?

2. Az nyilvánvaló, hogy amorf anyagok szerkezetének meghatározása egy speciálisan nehéz feladat. Azzal tudjuk megkönnyíteni a dolgunkat, vagy egyáltalán lehetővé tenni a szerkezet korrekt leírását, ha az összes releváns, rendelkezésre álló kísérleti információt bele vesszük a szimulációba a fordított Monte Carlo módszer segítségével. Ezáltal viszont elveszítjük annak lehetőségét, hogy a kapott eredményt valamilyen független kísérleti módszer alapján validáljuk. Kérdésem, hogy van-e olyan egyéb (pl. spektroszkópiai, elektromos, stb.) módszer, amely általánosan vagy esetleg bizonyos speciális esetekben használható az eredmények validálására.

3. Mennyiben bonyolítja (vagy egyszerűsíti) a helyzetet, ha a minta nanokristályos vagy valamilyen arányban kristálycsírákat tartalmaz, de ezek mérete nem elég nagy, hogy a mintát kristályos anyagként lehessen kezelni? Tud-e a Jelölt olyan vizsgálatokról, amelyekben a kristályosodás folyamata kezdeti lépéseit az általa is alkalmazott metodika alapján vizsgálták?

4. A különféle minták szerkezetének leírására szolgáló két fő adattípus a kötéshosszak és a koordinációs számok. A távolság jellegű paraméterek leírására általában párkorrelációs függvényeket ad meg a Jelölt, a koordinációkat viszont általában csak egy átlagos értékkel és annak szórásával jellemzi. Nem képzelhető el olyan szerkezet, amikor két vagy több egymástól eltérő tipikus lokális környezete van egy atomnak eltérő koordinációs számokkal? Ilyenkor egy átlagos érték nyilván nem jellemzi jól a koordinációt. Nem volna értelme a koordinációs számok valamilyen eloszlásfüggvényét megadni?

Összességében a Jelölt téziseit elfogadom új tudományos eredményként, javaslom a nyilvános védés kitűzését és sikeres védés esetén az MTA Doktora cím odaítélését.

Budapest, 2019. július 08.



Horváth Zsolt Endre

az MTA doktora